

VERBALE N. 6/2014

Il giorno 28 febbraio 2014, alle ore 11.00, presso la sala Consiglio del Dipartimento di Fisica - Cittadella Universitaria di Monserrato, si è riunito il Consiglio di Dipartimento di Fisica, convocato e presieduto dal Direttore Prof. Luciano Colombo per discutere il seguente Ordine del Giorno:

Seduta plenaria

1. Comunicazioni:
 - o del Direttore
 - o del rappresentante del Dipartimento in S.A.
2. Approvazione del verbale del Consiglio di Dipartimento del 29.01.2014
3. Variazioni di budget
4. Richiesta di sponsorizzazione del Convegno "Symmetry ad perturbation theory (SPT 2014)" - relatore: M. Cadoni
5. Richiesta attivazione no.2 borse di ricerca (fondi RAS) - relatore: P. Randaccio
6. Richiesta attivazione contratto (fondi "conto terzi") - relatore: P. Randaccio
7. a) Richiesta attivazione no.1 assegno di ricerca (fondi AUSI) - relatore: A. Mura
b) Richiesta attivazione no. 2 borse di ricerca (fondi RAS) – relatore: M. Saba
8. Approvazione della relazione finale dell'assegnista dott. E. Cadelano - relatore: G. Cappellini
9. Richiesta lettera di intenti dal Liceo "G. Galilei" di Macomer
10. Varie ed eventuali

Seduta riservata ai Professori di I e II fascia

11. Giudizio del Dipartimento di Fisica sul triennio di attività svolta dal prof. M. Ceccarelli ai fini della conferma in ruolo

Il Consiglio di Dipartimento è così composto:

Professori di I fascia:

Prof. Anedda Alberto	Assente giustificato
Prof. Casula Francesco	Presente
Prof. Colombo Luciano	Presente
Prof. D'Amico Nicolo'	Assente giustificato
Prof. Puddu Giovanna	Presente
Prof. Saitta Biagio	Assente giustificato

Professori di II fascia:

Prof. Bongiovanni Gianni	Presente
Prof. Burderi Luciano	Assente giustificato
Prof. Cadoni Mariano	Assente giustificato

DIPARTIMENTO DI FISICA

Prof. Cappellini Giancarlo	Presente
Prof. Ceccarelli Matteo	Presente
Prof. Concas Giorgio	Assente giustificato
Prof. Devoto Alberto	Presente
Prof. Fiorentini Vincenzo	Assente giustificato
Prof. Ledda Francesco	Assente
Prof. Mezzorani Giuseppe	Assente
Prof. Mura Andrea	Presente
Prof. Randaccio Paolo	Presente
Prof. Ruggerone Paolo	Presente
Prof. Usai Gianluca	Presente

Ricercatori

Dr Bernardini Fabio	Presente
Dr. Bosin Andrea	Assente giustificato
Dr Carbonaro Carlo Maria	Presente
Dr Caria Mario	Presente
Dr Chiriu Daniele	Presente
Dr Congiu Francesco	Assente giustificato
Dr Corpino Riccardo	Presente
Dr D'Alesio Umberto	Presente
Dr D'Apollonio Giuseppe	Assente giustificato
Dr De Falco Alessandro	Presente
Dott.ssa Fanti Viviana	Presente
Dott.ssa Geddo Lehmann Alessandra	Assente giustificato
Dott. Mallocci Giuliano	Presente
Dott.ssa Manca Giulia	Assente giustificato
Dr. Melis Claudio	Assente giustificato
Dr Mula Guido	Assente giustificato
Dr Oldeman Rudolf	Presente
Dr. Quochi Francesco	Presente
Dr. Ricci Pier Carlo	Presente
Dr. Riggio Alessandro	Assente
Dr Saba Michele	Presente
Dr Salis Marcello	Presente
Dr.ssa Satta Loredana	Assente giustificato
Dr. Vargiu Attilio Vittorio	Presente

Rappresentanti del personale tecnico-amministrativo:

Dott.ssa Bernardini Alessandra	Assente giustificato
Dott.ssa Marongiu Fernanda	Presente
Sig. Melis Luigi	Presente
Sig. Sirigu Ignazio	Presente

Rappresentante degli studenti iscritti al Dottorato di Ricerca:

Dr. Aresti Mauro	Presente
Dr. Cacciotto Pierpaolo	Assente giustificato
Dr. Calzia Vasco	Assente giustificato
Dr. Collu Alberto	Assente giustificato
Dott.ssa Del Rio Valentina	Assente
Dr. Mureddu Mario	Assente giustificato
Dr. Ricci Francesco	Assente giustificato
Dr. Serra Matteo	Presente

Il Consiglio è presieduto dal Prof. Luciano Colombo, Direttore del Dipartimento.

Verbalizza la dott.ssa Fernanda Marongiu

Il Presidente, verificato il numero legale, provvede alla lettura dell'Ordine del Giorno.

Seduta plenaria

1. Comunicazioni:

o **del Direttore**

Il Direttore riferisce in Consiglio riguardo ai seguenti argomenti:

- visite scolaresche nell'ambito del progetto Lauree Scientifiche nei giorni 11/03; 31/03; 14/04.
- Versione aggiornata della piattaforma web anagrafe della ricerca. La Direzione della ricerca chiede dei volontari per effettuare la sperimentazione. Si offrono i proff. Colombo, Ruggerone e i dri Quochi, Saba, Oldeman.
- Modifiche all'ordinamento del Corso di Laurea in Fisica approvate dal CUN. Vanno caricate entro il 07/03/2014.
- Università Milano Bicocca – Costituenda Associazione Italiana di Termoelettricità.
- Lettera di dimissioni prof. Cadoni dalla Giunta di Dipartimento e perciò anche dal Consiglio della Facoltà di scienze. Il direttore, nella sua facoltà di nominare un sostituto che durerà in carica fino alla scadenza naturale del mandato, ha individuato nel Dr. D'Alesio il sostituto del prof. Cadoni. Ringrazia il prof. Cadoni per il lavoro svolto.

o **del rappresentante del Dipartimento in S.A.**

Non ci sono comunicazioni

2. Approvazione del verbale del Consiglio di Dipartimento del 29.01.2014

Il Direttore porta all'attenzione del Consiglio il verbale della seduta del 29/01/2014.

Il Consiglio approva all'unanimità.

3. Variazioni di budget

Non ci sono variazioni da approvare.

4. Richiesta di sponsorizzazione del Convegno "Symmetry and perturbation theory (SPT 2014)" - relatore: M. Cadoni

Il Direttore porta all'approvazione del Consiglio la richiesta del prof. Cadoni di sponsorizzazione del Convegno "Symmetry and perturbation theory (SPT 2014)", precisando che è escluso qualsiasi onere a carico del Dipartimento.

Il Consiglio, unanime, approva.

5. Richiesta attivazione no.2 borse di ricerca (fondi RAS) - relatore: P. Randaccio

E' messa a votazione l'attivazione di n. 2 borse di ricerca nell'ambito del progetto dal titolo "Modelli spaziali di accessibilità tra siti nuragici nei paesaggi storici per l'analisi territoriale.", da finanziare su fondi RAS – L.R. 7/2007 annualità 2012, responsabile scientifico: prof. Paolo Randaccio.

Titolo delle borse: "Analisi dei resti vegetali e ceramici nei siti nuragici, datazione dei reperti organici con la tecnica del C14, datazione dei reperti ceramici con la tecnica della termoluminescenza" – Luogo di svolgimento dell'attività: Dipartimento di Fisica -

durata: 18 mesi ciascuna – importo: € 24.000,00 ciascuna al lordo degli eventuali oneri a carico dell'Amministrazione.

Il Consiglio approva all'unanimità seduta stante e autorizza il Segretario Amministrativo ad effettuare le variazioni di budget necessarie.

6. Richiesta attivazione contratto (fondi "conto terzi") - relatore: P. Randaccio

Il Direttore porta in Consiglio la richiesta del Prof. Randaccio per l'approvazione alla stipula di un contratto co.co.co della durata di 6 mesi dal titolo "*Attività di supporto operativo alla dosimetria personale e ambientale*", nell'ambito del progetto di ricerca conto terzi "*Sorveglianza fisica della protezione dalle radiazioni ionizzanti*"

Il Dipartimento ha provveduto a effettuare l'indagine interna per verificare l'eventuale disponibilità del personale dell'Ateneo a svolgere l'incarico a titolo gratuito.

Nel caso in cui tale indagine interna andasse deserta, la spesa, di € 12.000,00 onnicomprensivi, graverà sui fondi convenzioni conto terzi di cui è responsabile il Prof. Randaccio.

Il Consiglio approva all'unanimità seduta stante e autorizza il Segretario Amministrativo ad effettuare le variazioni di budget necessarie.

7. a) Richiesta attivazione no.1 assegno di ricerca (fondi AUSI) - relatore: A. Mura

Il Direttore porta all'approvazione del Consiglio la richiesta del prof. Mura per l'attivazione di n. 1 assegno di ricerca della durata di 12 mesi dal titolo "**Studio di processi fotocatalitici per la produzione di idrogeno mediante l'utilizzo di nanocristalli, nanostrutture e film ibridi anche in soluzione acquosa**", per un importo totale e onnicomprensivo di € 22.947,00 da finanziare su fondi CONVENZIONE AUSI, responsabile scientifico: prof. Antonio Andrea Mura. La spesa graverà sul progetto "CONVENZIONE AUSI PER ASSEGNO - MURA", voce COAN: A.15.01.02.04.01.01

Il Consiglio approva all'unanimità seduta stante e autorizza il Segretario Amministrativo ad effettuare le variazioni di budget necessarie.

b) Richiesta attivazione no. 2 borse di ricerca (fondi RAS) – relatore: M. Saba

E' messa a votazione l'attivazione di n. 2 borse di ricerca nell'ambito del progetto dal titolo "*Nanocristalli per la produzione di idrogeno dall'energia solare*", da finanziare su fondi RAS – L.R. 7/2007 annualità 2009, responsabile scientifico: dr. Michele Saba.

Borsa n. 1 – Titolo: *Spettroscopia ottica risolta in tempo di nanomateriali per l'energia solare* – Luogo di svolgimento dell'attività: Dipartimento di Fisica - durata: 5 mesi – importo: € 5.000,00 al lordo degli eventuali oneri a carico dell'Amministrazione.

Borsa n. 2 – Titolo: "*Studio della localizzazione di carica in strutture nanocristalline dot-rod mediante simulazione atomistica multiscala*" – Luogo di svolgimento dell'attività: Dipartimento di Fisica - durata: 11 mesi – importo: € 17.753,00 al lordo degli eventuali oneri a carico dell'Amministrazione.

Il Consiglio approva all'unanimità e autorizza il Segretario Amministrativo ad effettuare le variazioni di budget necessarie.

8. Approvazione della relazione finale dell'assegnista dott. E. Cadelano - relatore: G. Cappellini

Il prof. Cappellini presenta al Consiglio la relazione relativa al primo anno di attività dell'assegnista Emiliano Cadelano, che viene di seguito riportata:

Relazione di fine anno, Assegno di Ricerca sui fondi RAS progetto LR7/2007-RP26666

Assegnista : **Emiliano Cadelano**, nato a Sinnai in 28/06/1973, residente in Selargius in via S.Pietro 29, cap 09047 (Ca)

Coordinatore Scientifico Progetto INAF-OAC: Dr. Cesare Cecchi Pestellini

Responsabile dell'Unità Operativa Progetto UniCa: Prof. Giancarlo Cappellini

Titolo del progetto: La chimica all'alba del Sistema Solare: sintesi e selezione di molecole prebiotiche. (*The chemistry at the dawn of the Solar System: synthesis and selection of prebiotic molecules*).

Parole chiave: astrobiologia, astrochimica, spettroscopia teorica (*keywords: astrobiology, astrochemistry, theoretical spectroscopy*).

Argomenti di ricerca e risultati scientifici ottenuti

Argomento del presente progetto è lo studio delle proprietà ottiche ed elettroniche di molecole di interesse biologico sia in fase isolata che depositate su superfici solide. Tale studio si avvale di tecniche teorico/computazionali. L'interesse sui suddetti sistemi deriva sia da recenti sviluppi in ambito astrochimico che da possibili applicazioni in dispositivi elettronici basati su fenomeni di interfaccia superficie metallica/molecola.

Differenti codici di calcolo, basati sulla teoria del funzionale densità (DFT) sono stati utilizzati per lo studio delle proprietà di eccitazione elettronica ed ottiche sia nel caso di sistemi biomolecolari in fase gassosa rarefatta (nello specifico: uracile, timina e citosina facenti parte delle famiglia delle pirimidine), che in quello di sistemi solidi ad alto gap (e.g. il composto Fluorite di Bario). A tale scopo sono state utilizzati i seguenti pacchetti software: *NWCHEM, OCTOPUS, VASP e ABINIT*.

Si tratta di codici di calcolo, basati su differenti approssimazioni e con caratteristiche tecniche diverse che permettono di ottenere risultati che vanno dalle proprietà di stato fondamentale fino alla determinazione di effetti a molti corpi sia di sistemi isolati che di sistemi estesi.

I primi due codici sono stati utilizzati per la caratterizzazione teorica delle molecole isolate mentre i pacchetti VASP ed ABINIT sono stati utilizzati per il calcolo degli effetti a singola particella e dell'assorbimento ottico per i sistemi condensati. Per quanto riguarda le biomolecole, gli spettri ottici ultravioletti ottenuti finora risultano essere dei promettenti candidati atti alla caratterizzazione delle miscele gassose di differenti tautomeri dei citati clusters in ambiente astronomico (e non). Inoltre sono state sistematicamente calcolate le energie di ionizzazione ed affinità elettroniche allo scopo di poter caratterizzare, nel proseguo del presente progetto, anche forme molecolari ionizzate. Tali configurazioni risulterebbero possedere tempi di stabilità molto lunghi in ambiente astronomico, data appunto la favorevole situazione di isolamento e la contestuale abbondanza di radiazione UV disponibile.

La struttura delle eccitazioni elettroniche permesse è stata determinata quindi nel dettaglio anche per mezzo di calcoli di tipo *Tensor Contraction Engine* (TCE), utilizzando funzionali di tipo *Coupled-Cluster* (CC). L'utilizzo di tali tecniche ha permesso inoltre la determinazione della struttura delle funzioni d'onda molecolari ed i dettagli delle transizioni elettroniche di interesse.

Presentazioni a congressi e presso istituti esteri effettuate dall'assegnista

-*"Elastic properties of graphenes"*, 29/07/2013, presentazione talk presso Nanoscopic Physics Division (NAPS), Université Catholique de Louvain, Belgium

-*"The RAS LR7/2007-RP26666 project:future perspectives"*, 30/07/2013 presentazione talk al Nanoscopic Physics Division (NAPS), Université Catholique de Louvain, Belgium

-*"UV spectra of pyrimidines via TD-DFT computations: the role of tautomers and polarization."*, presentazione poster al XVIII Workshop ETSF, Luxembourg, 01-04/10/2013 (coautori Dr. G. Mulas e Prof. G. Cappellini)

Publicazioni:

- "One- and two-particle effects in the electronic and optical spectra of barium fluoride" (JPCM-100819.R1) Journal of Physics: Condensed Matter., 2014 in corso di stampa (coautori: Dr. J. Furthmueller, Prof. G. Cappellini, Prof. F. Bechstedt)
- "UV spectra of pyrimidines via TD-DFT computations: the role of tautomers." , in preparazione (coautori: Dr. G. Mulas, Prof. G. Cappellini)

Possibili sviluppi futuri:

A seguito dei risultati ottenuti e della conclusione delle ricerche in corso pensiamo nel prossimo futuro di passare allo studio delle proprietà elettroniche di stato fondamentale e di eccitazione di molecole (e.g. le pirimidine) adsorbite su superfici solide (e.g. sulle superfici SiGe(001) e C(001)).

Dopo breve discussione il Consiglio approva all'unanimità e seduta stante la relazione dell'assegnista Emiliano Cadelano relativa al primo anno di attività.

9. Richiesta lettera di intenti dal Liceo "G. Galilei" di Macomer

Il direttore porta all'attenzione del consiglio la lettera del dirigente scolastico del Liceo Galilei di Macomer, con la quale si chiede al dipartimento di Fisica di voler sostenere quella scuola con una dichiarazione di intenti di assunzione del ruolo di partner nella realizzazione di laboratori didattici, da svolgere presso i locali del dipartimento, rivolti agli allievi del biennio e finalizzati alla diffusione della cultura scientifica.

Dopo breve discussione il Consiglio approva all'unanimità e dà mandato al direttore di redigere la dichiarazione di intenti richiesta.

10. Varie ed eventuali

Non ci sono argomenti da discutere.

Seduta riservata ai Professori di I e II fascia

11. Giudizio del Dipartimento di Fisica sul triennio di attività svolta dal prof. M. Ceccarelli ai fini della conferma in ruolo

Il Direttore porta all'approvazione del Consiglio il giudizio sul triennio di attività del prof. Ceccarelli. Essendo questo un compito nuovo affidato al dipartimento, il Consiglio dà mandato al direttore di predisporre un facsimile di delibera e di incaricare il docente decano del SSD Fis07 di predisporre una bozza da portare all'approvazione del prossimo Consiglio.

Non essendoci altro da discutere e deliberare, la seduta del Consiglio è tolta alle ore 12.15

Il Segretario Verbalizzante

Il Direttore del Dipartimento

Dott.ssa Fernanda Marongiu

Prof. Luciano Colombo